

ABSTRAK

IQBAL WAHID ABDULLAH, 2021, ANALISIS PENAMBATAN MOLEKULER SENYAWA KANDUNGAN BUAH DELIMA (*Punica granatum* L.) TERHADAP PROTEIN TARGET COVID-19 DAN PREDIKSI PROFIL FARMAKOKINETIKA, PROPOSAL SKRIPSI, PROGRAM STUDI S1 FARMASI, FAKULTAS FARMASI, UNIVERSITAS SETIA BUDI, SURAKARTA. Dibimbing oleh Dr. Rina Herowati, M.Si., Apt dan Fransiska Leviana, M.Sc., Apt

Covid-19 disebabkan oleh infeksi virus *Severe Acute Respiratory Syndrome Coronavirus 2* (SARS-CoV-2) dan menjadi pandemik dunia. Saat ini belum ditemukan obat yang ampuh untuk pengobatan Covid-19. Penelitian ini memiliki tujuan dapat memberikan data ilmiah senyawa buah delima terkait prediksi aktivitasnya sebagai antivirus pada Covid-19 yang berdasarkan interaksi dengan protein target Covid-19 dan prediksi profil farmakokinetika. Penelitian ini menggunakan metode penambatan molekuler dengan buah delima (*Punica granatum* L.) sebagai senyawa uji dan 3CLpro, PLpro, RdRp sebagai protein target Covid-19.

Buah delima terbukti memiliki aktivitas antivirus pada uji *in vitro*. Secara empiris telah digunakan sebagai pengobatan tradisional memiliki berbagai manfaat salah satunya untuk antimikroba. Penggunaan produk alami dapat mengurangi kekhawatiran peneliti akan efek samping obat kimia. Penambatan molekuler menggunakan *software* autodock PyRx, PyMOL, dan Biovia DS untuk visualisasi hasil penambatan molekuler. Prediksi profil farmakokinetika menggunakan *web server* SwissAdme dan *web server* ADMETlab 2.0.

Terdapat 14 senyawa kandungan buah delima yang diprediksi memiliki efek antivirus. Senyawa myricetin dan asam gallat memiliki hasil interaksi yang baik pada protein target 3CLpro. Senyawa luteolin dan anthocyanin memiliki hasil interaksi yang baik pada protein target PLpro. Senyawa pelargonidin, asam ellagik, apigenin, dan luteolin memiliki hasil interaksi yang baik pada protein target RdR. Senyawa asam gallat, myricetin dan asam ellagik memiliki profil farmakokinetik yang baik dilihat dari parameter absorpsi yang baik, nilai BBB yang rendah sehingga tidak menembus sawar darah otak, dapat dimetabolisme dengan baik, dan memiliki toksisitas yang rendah.

Kata kunci : Covid-19, buah delima, penambatan molekuler, autodock vina, ADMETlab 2.0

ABSTRACT

IQBAL WAHID ABDULLAH, 2021, MOLECULAR DOCKING ANALYSIS OF COMPOUNDS CONTENTS OF POMEGRANATE FRUIT (*Punica granatum* L.) ON TARGET PROTEIN COVID-19 AND PHARMACOKINETICS PROFILE PREDICTION, THESIS, BACHELOR OF PHARMACY, FACULTY OF PHARMACY, SETIA BUDI UNIVERSITY, SURAKARTA. Supervised by Dr. Rina Herowati, M.Si., Apt and Fransiska Leviana, M.Sc., Apt

Covid-19 is caused by infection with *Ernstige Akute Respiratoriese Respiratoriese Virus 2 (SARS-CoV-2)* and is a worldwide pandemic. There is currently no effective cure for the treatment of Covid-19. This study aims to provide scientific data on pomegranate compounds related to predictions of their activity as an antiviral in Covid-19 based on interactions with Covid-19 target proteins and predictions of pharmacokinetic profiles. The study used molecular tethering methods with pomegranates (*Punica granatum* L.) as test compounds and 3CLpro, PLpro, RdRp as proteïen teiken Covid-19.

Pomegranates have been shown to have antiviral activity in in vitro tests. Empirically it has been used as a traditional medicine has various benefits, one of which is for antimicrobials. The use of natural products can reduce researchers' concerns about the side effects of chemical drugs. Molecular tethering uses PyRx, PyMOL, and Biovia DS autodock software for visualization of molecular tethering results. Pharmacokinetic profile predictions using SwissAdme web server and web server ADMETlab 2.0.

There are 14 compounds of pomegranate content that are predicted to have antiviral effects. Myricetin and galic acid have good interaction results in the target protein 3CLpro. Luteolin compounds and anthocyanins have good interaction results in PLpro target proteins. Pelargonidin, ellagic acid, apigenin, and luteolin compounds have good interaction results in the target protein RdR. Galic acid, myricetin and ellagic acid compounds have good pharmacokinetic profiles judging by good absorbance parameters, low BBB values so they do not penetrate the blood barrier of the brain, are well metabolized, and have low toxicity.

Keywords : COVID-19, pomegranate, molecular docking, autodock vina, ADMETlab 2.0